

УДК 519.6

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ "НИМФА" ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НЕЛИНЕЙНОЙ ОДНОФАЗНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ЖИДКОСТИ И ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

О. И. Бутнев, М. Л. Глинский, И. В. Горев, А. А. Куваев, П. А. Машенькин,
В. А. Пронин, М. Е. Семёнов, М. Л. Сидоров
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области;
ФГБУ "Гидроспецгеология", г. Москва)

Представлено описание программного комплекса НИМФА и методики решения задач нелинейной однофазной фильтрации жидкости и тепломассопереноса в пористых средах. Приведены основные уравнения моделируемых процессов, а также используемые сетки. Показано качественное и количественное согласие результатов на задачах, имеющих аналитические решения, и задачах, рассчитанных с помощью других программных комплексов.

Ключевые слова: программный комплекс НИМФА, модель однофазной фильтрации, тепломассоперенос.

Введение

Важнейшей проблемой развития атомной промышленности России является обеспечение безопасного функционирования ее объектов. В этой связи актуально получение достоверной информации о воздействии ядерных и радиационно опасных объектов (ЯРОО) и хранилищ радиационно опасных отходов на грунты, грунтовые и поверхностные воды.

Основным методом, позволяющим получить количественные пространственно-временные характеристики воздействия ЯРОО на природные среды, в частности недра, является компьютерное моделирование процесса движения подземных вод (геофильтрации) и связанного с ним подземного массопереноса (геомиграции), выполняемое с использованием данных объектового мониторинга состояния недр. Математическое моделирование процессов миграции подземных вод требует специальных программных средств, позволяющих учитывать широкий спектр физико-химических процессов и ориентированных на пользователя-гидрогеолога-геоэколога. В настоящее время в Российской Федерации математическое моделирование процессов подземного тепломассопереноса осуществляется в основном с использованием зарубежных программных продуктов. Чаще всего это вычислительные программы семейств MODFLOW [1], SEAWAT [2] (разработчик — USGS, США) и программный комплекс TOUGH-2 [3] (разработчик — LBNL, США).

Работы по созданию инновационного отечественного программного комплекса НИМФА [4] выполнялись с 2014 года по программе, утвержденной в 2013 году генеральным директором Госкорпорации "Росатом". В 2017 году проведена его аттестация в НТЦ ЯРБ (регистрационный номер 419), а также разработана перспективная программа внедрения и использования программного комплекса НИМФА в качестве отраслевого стандартного программного продукта для проведения геоэкологических расчетов по оценке воздействия ЯРОО на подземные воды, поверхностные воды и грунты.

Назначение комплекса программ НИМФА

Комплекс программ НИМФА предназначен для численного моделирования нестационарных трехмерных неизотермических геофильтрационных и геомиграционных потоков локального и регионального масштабов в напорных водоносных горизонтах, неоднородных по физическим свойствам.

Основными задачами численного моделирования в программном комплексе НИМФА являются расчеты:

- полей напоров и скоростей геофильтрационного потока;
- траекторий геофильтрационного потока;
- ореолов химического и радиоактивного загрязнения, распространяющегося в геофильтрационном потоке от ЯРОО, а также других потенциальных источников загрязнения подземных вод (свалок твердых бытовых отходов, промышленных водоемов-накопителей, полей фильтрации и т. д.).

При моделировании учитывается взаимодействие геофильтрационного и геомиграционного потоков с поверхностными водоемами и водотоками, а также косвенно с атмосферными водными потоками посредством задания в модели *инфильтрационного* питания (проникновения атмосферных и поверхностных вод в почву) и *эвапотранспирации* грунтовых вод (эффекта испарения из почвы и с поверхности растительности).

Миграция растворенных радиоактивных и химических компонентов (специй) рассматривается с учетом молекулярной диффузии, гидродинамической дисперсии, радиоактивного распада, а также задержки за счет обратимой сорбции на водовмещающих породах. При расчетах геофильтрации и геомиграции учитывается также плотностная дифференциация флюида в потоке, которая может быть обусловлена как тепловой, так и солевой конвекцией.

Программный комплекс НИМФА не включает непосредственно модели источников загрязнения. Последние учитываются как граничные условия и источники-стоки геофильтрационного и геомиграционного потоков и требуют специального обоснования.

Модель мигрирующего раствора включает в себя множество компонентов. Подверженность радиоактивному распаду, сорбции, диффузии и влияние на плотность и вязкость раствора задаются для конкретных компонентов. Программа учитывает неоднородность водной системы по всем фильтрационно-емкостным параметрам и тензору дисперсии.

Математическая формулировка трехмерной модели

Модель напорной фильтрации. Модель напорной фильтрации подземных вод в пористой среде описывается следующей системой уравнений:

- закон сохранения массы

$$\frac{\partial(m\rho_{\Phi})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{\Phi}\vec{v}) = q_{\Phi}; \quad (1)$$

- закон Дарси, связывающий скорость фильтрации с перепадом давлений,

$$\vec{v} = \frac{K}{\mu_{\Phi}}(\operatorname{grad} P - \rho_{\Phi}\vec{g}), \quad (2)$$

где m — пористость среды; ρ_{Φ} — плотность флюида; t — время; q_{Φ} — массовый источник флюида; \vec{v} — скорость фильтрации; K — тензор (3×3) абсолютной проницаемости породы; μ_{Φ} — динамическая вязкость флюида; P — давление; \vec{g} — ускорение свободного падения.

Модель миграции. Для учета переноса примесей подземными водами необходимо дополнить систему (1), (2) законом сохранения массы каждого компонента раствора:

$$\frac{\partial(mC)}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{v}C - (D + ID_m)\operatorname{grad} C) = q_C + W_s, \quad (3)$$

где C — концентрация вещества в растворе; D — тензор (3×3) суммарной дисперсии; I — единичный тензор (3×3); D_m — коэффициент молекулярной диффузии; q_C — массовый источник концентрации; W_s — объемная интенсивность источников поглощения/выделения вещества.

Модель теплопроводности. Для учета тепловых эффектов к системе уравнений (1)–(3) необходимо добавить уравнение переноса тепла

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\left[m\rho_\Phi C_\Phi + (1-m)\rho_\Pi C_\Pi \right] T \right) + \operatorname{div} (\rho_\Phi \vec{v} C_\Phi T - \varkappa \operatorname{grad} T) = q_T, \quad (4)$$

где C_Π , C_Φ — удельная теплоемкость породы и флюида соответственно; ρ_Π , ρ_Φ — плотность породы и флюида; T — температура; \varkappa — суммарная теплопроводность; q_T — источник тепла.

В комплексе программ НИМФА применяется модель распространения тепла, в которой температура флюида и температура *скелета породы* (твёрдой части пористой среды) равны и время выравнивания этих температур пренебрежимо мало по сравнению с характерным временем фильтрации.

Модель распада и сорбции. Распад и мгновенная сорбция описываются следующими уравнениями:

$$W_s = -\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - \lambda_1 m C - \lambda_2 \bar{C}; \quad \bar{C} = \rho_\Pi f(C),$$

где $f(C)$ — изотерма сорбции (зависимость количества адсорбированного вещества в концентрации раствора при постоянной температуре); \bar{C} — концентрация вещества на породе (в единичном объеме); ρ_Π — плотность породы; λ_1 — константа распада для растворенной фазы; λ_2 — константа распада для твёрдой фазы.

В комплексе НИМФА реализованы изотермы:

- Генри $f(C) = K_\Gamma C$;
- Фрейндлиха $f(C) = K_\Phi C^\alpha$;
- Лэнгмюра $f(C) = \frac{K_\Delta \bar{S} C}{1 + K_\Delta C}$,

где K_Γ , K_Φ , K_Δ — коэффициенты фазового распределения; α — показатель степени в изотерме Фрейндлиха; \bar{S} — сорбционная емкость породы.

С учетом того, что производную $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t}$ можно представить в виде $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t}$, в уравнении (3) вклад в W_s от сорбции будет следующий:

- для изотермы Генри $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = -K_\Gamma \rho_\Pi \frac{\partial C}{\partial t}$;
- для изотермы Фрейндлиха $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = -K_\Phi \rho_\Pi \alpha C^{\alpha-1} \frac{\partial C}{\partial t}$;
- для изотермы Лэнгмюра $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = -\frac{K_\Delta \rho_\Pi \bar{S}}{(1 + K_\Delta C)^2} \frac{\partial C}{\partial t}$.

Перенеся W_s в левую часть уравнения (3), получим уравнение для фактора замедления R :

$$\frac{\partial mC}{\partial t} + W_s = m \left(1 + \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \right) \frac{\partial C}{\partial t} = mR \frac{\partial C}{\partial t},$$

где

- для изотермы Генри $R = 1 + \frac{K_\Gamma \rho_\Pi}{m}$;
- для изотермы Фрейндлиха $R = 1 + \frac{K_\Phi \rho_\Pi}{m} C^{\alpha-1}$;

– для изотермы Лэнгмюра $R = 1 + \frac{K_{\text{Л}}\rho_{\text{п}}\bar{S}}{m} \frac{1}{(1 + K_{\text{Л}}C)^2}$.

Модель плотностной конвекции. Учет распространения различных веществ в недрах, как и учет распространения тепла, может по-разному влиять на динамику подземных вод.

Случаи, когда состав воды и ее температура не влияют на динамические характеристики, являются самыми простыми. Уравнение состояния для данной математической модели очевидно: $\rho_{\text{ф}} = \text{const}$; $\mu_{\text{ф}} = \text{const}$. Часто встречаются случаи, когда плотность флюида меняется в зависимости от его температуры и концентрации вещества. Тогда плотность описывается зависимостью $\rho_{\text{ф}} = \rho_{\text{ф}}(P, C, T)$, вязкость — $\mu_{\text{ф}} = \mu_{\text{ф}}(C, T)$. В этом случае необходимо решать систему (1)–(4) совместно.

Начальные условия. По умолчанию начальные условия задаются в виде

$$H(x, y, z, t = 0) = H_0(x, y, z); \quad C_i(x, y, z, t = 0) = C_{i0}(x, y, z); \quad T(x, y, z, t = 0) = T_0(x, y, z),$$

где H — пьезометрический напор пресной воды (высота столба жидкости в породе); C_i — концентрация i -го вещества; T — температура. Если не указано иное, то $C_{i0}(x, y, z) = 0$; $T_0(x, y, z) = 0$; $H_0(x, y, z)$ вычисляется по z -координатам центров ячеек. Так как уравнения (1), (2) записаны относительно давления, то напор пресной воды в каждой ячейке переводится в давление по формуле $P = (H - z)\rho_{\text{п}}g$.

Граничные условия. Граничные условия могут задаваться на частях граничной поверхности области моделирования (кровля, подошва, боковая поверхность). Это условия 1-го, 2-го, 3-го рода, зависящие от координат и времени. По умолчанию на всех границах и для всех моделируемых процессов задано условие 2-го рода — производная по нормали от величины равна нулю (т. е. для процесса фильтрации $\frac{\partial H}{\partial n} = 0$, для процесса миграции $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$, для процесса теплопроводности $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$).

Следует особо отметить, что при моделировании конвективного переноса в отсутствие диффузии/дисперсии на границах, через которые поток направлен внутрь области, необходимо задание концентраций (если концентрация не задана, она берется равной нулю). Если поток выходит из области, то задавать концентрацию на границе области не требуется.

Уравнения состояния. В комплексе программ НИМФА реализованы следующие уравнения состояния:

– зависимость пористости от давления

$$m(P) = m_0 + \beta(P - P_0),$$

где β — сжимаемость породы; m_0 — пористость при давлении P_0 . Пористость не допускается нулевой и ограничивается снизу параметром m_{thresh} ;

– зависимость плотности от давления, температуры и концентраций веществ

$$\rho(P, T, \bar{C}) = \rho_0 + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial C} \right)^i (C^i - C_0^i) + \frac{\partial \rho}{\partial T} (T - T_0) + \frac{\partial \rho}{\partial P} (P - P_0),$$

где C_0^i — опорная концентрация (при которой отсутствует влияние i -го компонента примеси на плотность вещества); $\left(\frac{\partial \rho}{\partial C} \right)^i$ — константа, характеризующая изменение плотности от концентрации i -го компонента вещества; $\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)$, $\left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)$ — константы, характеризующие изменение плотности от температуры и давления;

– зависимость вязкости от температуры и концентраций веществ

$$\mu(T, \bar{C}) = \mu_T(T) + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mu}{\partial C} \right)^i (C^i - C_0^i),$$

где $\left(\frac{\partial \mu}{\partial C} \right)^i$ – константа, характеризующая изменение вязкости от концентрации i -го компонента вещества. Для реализации зависимости вязкости от температуры $\mu_T(T)$ используются четыре различные формулы (табл. 1).

Таблица 1

Формулы зависимости вязкости от температуры

Формула $\mu_T(T)$	Константы	Примечание
$\mu_0 + \frac{\partial \mu}{\partial T} (T - T_0)$	$\frac{\partial \mu}{\partial T}$ – характеризует изменение вязкости от температуры	Для моделирования слабо меняющейся вязкости воды
$A_0 A_1^{A_2/(T+A_3)}$	$A_0 = 2,394 \cdot 10^{-5}$; $A_1 = 10$; $A_2 = 248,37$; $A_3 = 133,15$	Для моделирования вязкости воды
$A_0 [A_1 + A_2 (T + A_3)]^{A_4}$	$A_0 = 10^{-3}$; $A_1 = 1$; $A_2 = 1,5512 \cdot 10^{-2}$; $A_3 = -20$; $A_4 = -1,572$	Для моделирования вязкости нефти
$A_0 T^{A_1}$	$A_0 = 0,168$; $A_1 = -1,0868$	Для моделирования вязкости нефти

Источники/стоки. В программном комплексе НИМФА реализованы следующие модели источников/стоков: скважины, реки, линейные/площадные дрены, водоемы, инфильтрация, эвапотранспирация.

Дискретизация уравнений

Аппроксимация уравнения фильтрации. Подставляя (2) в (1) и интегрируя полученное уравнение по объему ячейки ΔV с использованием формулы Гаусса–Остроградского, получаем следующий разностный аналог:

$$\frac{(m\rho)^{n+1} - (m\rho)^n}{\Delta t} \Delta V - \sum_{f=1}^{N_f} \left[\left(\rho \frac{K}{\mu} \right)^{n+1} (\text{grad}(P^{n+1}) - \rho \vec{g}) \right]_f \cdot \vec{n}_f \Delta S_f = Q_F, \quad (5)$$

где $Q_F = q\Delta V$ – приток массы флюида в ячейку за единицу времени; суммирование ведется по граням ячейки: \vec{n}_f – нормаль к грани; ΔS_f – площадь грани.

Введем разностный оператор Λ_f^F , аппроксимирующий поток через грань; коэффициент при градиенте будем брать с шага итерации γ :

$$\Lambda_f^F (P^{\gamma+1}) = \left(\left(\rho \frac{K}{\mu} \right)^\gamma (\text{grad}(P^\gamma + \Delta P) - \rho \vec{g}) \right)_f \cdot \vec{n}_f \Delta S_f,$$

$$\Lambda_f^F (P^{\gamma+1}) = \Lambda_f^{FE} (P^\gamma) + \Lambda_f^{FI} (\Delta P),$$

где

$$\Lambda_f^{FE} (P^\gamma) = \left(\left(\rho \frac{K}{\mu} \right)^\gamma (\text{grad} P^\gamma - \rho \vec{g}) \right)_f \cdot \vec{n}_f \Delta S_f; \quad \Lambda_f^{FI} (\Delta P) = \left(\left(\rho \frac{K}{\mu} \right)^\gamma \text{grad} \Delta P \right)_f \cdot \vec{n}_f \Delta S_f.$$

Используя оператор Λ_f^F , проводим линеаризацию уравнения (5) и находим решение на каждом последующем шаге итерации:

$$\frac{(m\rho)^{\gamma+1} - (m\rho)^n}{\Delta t} \Delta V - \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^F (P^{\gamma+1}) = Q_F.$$

С учетом того, что

$$(m\rho)^{\gamma+1} = (m\rho)^\gamma + \left(\frac{\partial(m\rho)}{\partial P} \right)^\gamma \Delta P, \quad \Delta P = P^{\gamma+1} - P^\gamma,$$

окончательно разностное уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{\left(\frac{\partial(m\rho)}{\partial P} \right)^\gamma \Delta P}{\Delta t} \Delta V - \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{FI}(\Delta P) = Q_F + \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{FE}(P^\gamma) - \frac{(m\rho)^\gamma - (m\rho)^n}{\Delta t} \Delta V.$$

Из полученного уравнения видно, что в правой части вычисляется сумма потока от источника и отрицательной невязки исходного уравнения.

В стационарном случае разностная схема выглядит так:

$$\frac{\Delta P}{\omega} \Delta V - \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{FI}(\Delta P) = Q_F + \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{FE}(P^\gamma),$$

где ω — релаксационный параметр схемы.

Аппроксимация явного $\Lambda_f^{FE}(P^\gamma)$ и неявного $\Lambda_f^{FI}(\Delta P)$ операторов диффузионного потока выполняется с помощью метода отложенной коррекции [4].

Аппроксимация скорости фильтрации. Вектор скорости фильтрации в центре ячейки вычисляется с помощью метода наименьших квадратов или интегрированием по объему ячейки массовых потоков.

Аппроксимация уравнений переноса концентрации и тепла. Уравнения для расчета переноса концентрации (3) и тепла (4) содержат, помимо диффузионного, конвективный член. Схемы для этих уравнений в случаях миграции и теплопереноса строятся аналогично, поэтому ограничимся схемой для уравнения миграции

$$R^n m \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} \Delta V - \left(\sigma \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^M (C^{n+1}) + (1 - \sigma) \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^M (C^n) \right) = Q_M,$$

где σ — вес схемы ($\sigma = 1$ — неявная; $\sigma = 0$ — явная; $\sigma = 0,5$ — схема типа Кранка—Николсона);

$R^n = \left(1 + \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} \right)^n$, \bar{C} — определяется из формулы используемой изотермы сорбции.

Проведем преобразования аналогично уравнению фильтрации и получим

$$\frac{R^n m \Delta C}{\Delta t} \Delta V - \sigma \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^M(\Delta C) = Q_M + \sigma \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^M(C^\gamma) + (1 - \sigma) \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^M(C^n) - \frac{(mC)^\gamma - (mC)^n}{\Delta t} \Delta V,$$

где $\Delta C = C^{\gamma+1} - C^\gamma$.

Оператор Λ_f^M определяется несколько иначе, чем оператор потока в фильтрации — в него входит конвективный член:

$$\Lambda_f^M(C^\gamma) = \left[\left(\vec{v} C_f - D \text{grad } C \right) \cdot \vec{n}_f \right] \Delta S_f; \quad \Lambda_f^M(\Delta C) = \left[\left(\vec{v} \Delta C_f - D \text{grad } \Delta C \right) \cdot \vec{n}_f \right] \Delta S_f.$$

Диффузионная часть $D \operatorname{grad} \Delta C \cdot \vec{n}_f$ аппроксимируется по методу отложенной коррекции, а для аппроксимации конвективного слагаемого $\vec{v} \Delta C_f \cdot \vec{n}_f$ используется TVD-схема [2] с различными видами ограничителей.

Методы решения

Решение конечно-объемных уравнений. Основная идея метода решения рассмотренной выше системы определяющих уравнений — расщепление по процессам фильтрации, массопереноса и теплопроводности во взаимодействующих напорных водоносных и разделяющих пластах. Основными величинами, которые рассчитываются методом конечных объемов, являются поля давления, концентрации примесей и температуры в больших многослойных гидрогеологических системах. Время моделирования процессов зависит от задачи (сутки, десятки, сотни лет и т. д.). Исходные дифференциальные уравнения являются нелинейными. Они могут быть связаны между собой через скорость фильтрации, плотность и вязкость жидкости. Также учитывается зависимость пористости пород от давления.

Неизвестные величины, определяемые в процессе счета, приведены в табл. 2.

Таблица 2

Неизвестные величины

Величина	Обозначение	Размерность
Напор подземных вод (относительно чистой воды)	H	м
Концентрация i -го мигранта в поровом растворе	C_i	г/л
Температура подземных вод	T	К
Плотность порового раствора	ρ	г/л
Вектор скорости фильтрации	\vec{v}	м/сут

Алгоритм решения системы базовых уравнений основан на линеаризации системы конечно-объемных уравнений и последовательном решении соответствующего уравнения для каждого процесса и компонентов отдельно друг от друга (метод SEQ). Линеаризация системы конечно-объемных уравнений выполняется относительно приращений давления, концентраций и температуры. При этом в процессе счета образуются распределенные разреженные матрицы порядка $N + N_{wells}$ для фильтрации, N для миграции и N для теплопроводности (N — число ячеек сетки, N_{wells} — число скважин). Система линейных алгебраических уравнений решается в параллельном режиме методами, реализованными в библиотеке LParSol [5], созданной в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Дискретизация периода моделирования. Весь период моделирования представляет собой объединение нескольких временных периодов разной продолжительности, на каждом из которых реализуется свой режим функционирования гидрологических объектов. Такие периоды называются *стресс-периодами*. Например, на одном стресс-периоде скважина может быть нагнетательной, на другом — добывающей. Другой пример — сезонные явления, такие как осадки или пересыхание рек. Каждый период разбивается пользователем на K фильтрационных временных шагов. Каждый фильтрационный шаг может содержать определенное количество миграционных шагов. Рассчитываемая однофазная фильтрация внутри одного стресс-периода может быть как стационарной, так и нестационарной.

Автоматический выбор шага по времени. Весовая схема для решения уравнений массопереноса при $\sigma < 1/2$ является условно устойчивой. Условие устойчивости схемы формулируется следующим образом: объем вещества, переносимый за единицу времени в ячейку, не превышает объема самой ячейки. Данное условие является условием устойчивости по Куранту. Оно формулируется как для внутренних потоков между ячейками, так и для источников/стоков. На основании этого условия выбирается шаг по времени для решения уравнения тепломассопереноса явным или

неявным методом. Следует отметить, что при наличии процессов дисперсии и диффузии всегда используется неявная схема расчета и шаг по времени в программе не ограничивается (так как схема абсолютно устойчива).

Верификация программного комплекса НИМФА

Для тестирования программного комплекса НИМФА были использованы задачи, имеющие аналитическое решение, а также его не имеющие, но численно исследованные ранее с помощью известных программных комплексов [1–3], рассматриваемых как стандартные. Для комплекса НИМФА была разработана *матрица верификации* в виде набора из 21 теста. В тестовых задачах присутствуют следующие процессы: фильтрация (стационарная и нестационарная), адвекция, дисперсия, диффузия, плотностная конвекция, сорбция, радиоактивный распад и теплопроводность.

Для дискретизации области использовались различные виды двумерных (поверхностных) сеток: регулярная четырехугольная (рис. 1, *а*), неструктурированная треугольная (рис. 1, *б*), неструктурированная многоугольная (рис. 1, *в*), неструктурированная сетка из треугольников и четырехугольников (рис. 1, *г*). Вдоль оси OZ применялась экструзия поверхностных сеток на один слой.

Построение сеточной модели рассчитываемого объекта выполняется с помощью запатентованного генератора [6] неструктурированных сеток для пластовых объектов. Алгоритмы построения сетки изложены в работе [7]. Отличительной особенностью генератора является возможность построения неструктурированной сетки в параллельном режиме в модели распределенной памяти. Такой подход позволяет быстро строить сетки с количеством ячеек до нескольких миллиардов. Финальная сетка является распределенной (в виде параобластей) с перекрытием ячеек в один слой. Возможность построения неструктурированных сеток с таким количеством ячеек позволяет рассчитывать на суперЭВМ не только локальные, но и региональные модели территорий с детальной дискретизацией интересных объектов.

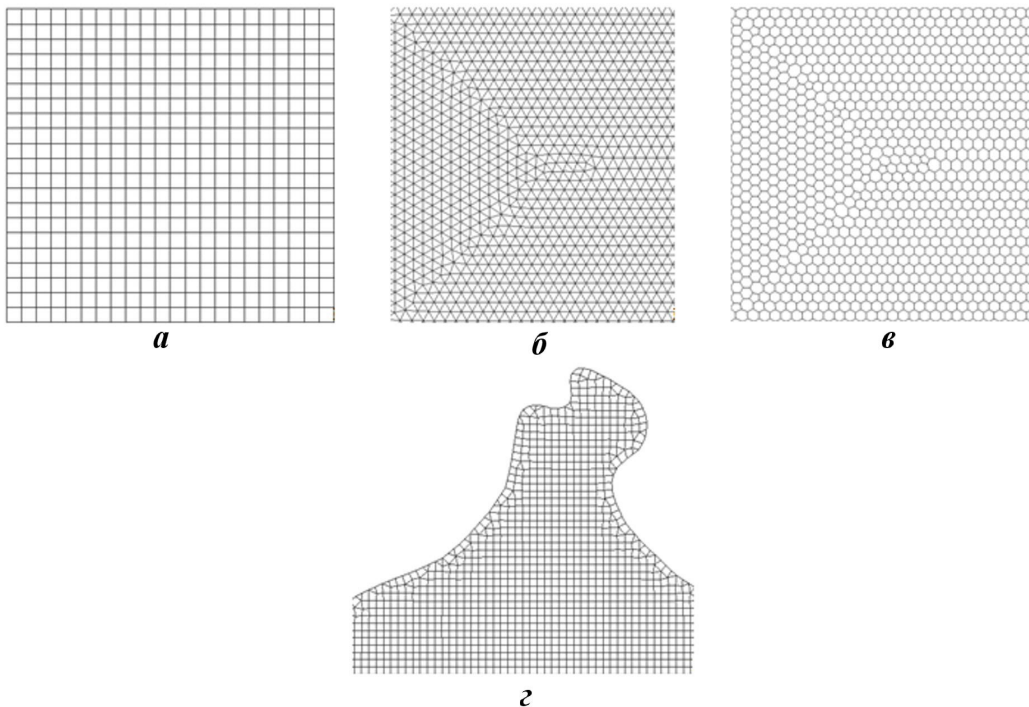


Рис. 1. Виды сеток, используемых в расчетах: *а* — регулярная четырехугольная; *б* — неструктурированная треугольная; *в* — неструктурированная многоугольная; *г* — неструктурированная из треугольников и четырехугольников

Сравнение результатов тестов с аналитическим решением проводилось с помощью относительной погрешности L_1 , рассчитываемой по формуле

$$L_1 = \frac{\sum_i |f_i^{analit} - f_i^{calc}|}{\sum_i |f_i^{analit}|} \cdot 100 \%,$$

где суммирование проводится по всем ячейкам области.

Расчеты задач из матрицы верификации показывают, что в задачах с аналитическим решением отклонение численного решения в основном не превышает 2%. В одном из тестов отклонение на локальном участке достигает 5,6%, однако оно обусловлено спецификой теста, и для уменьшения отклонения необходимо использовать еще более подробную сетку. Приведем результат расчета одного из тестов с аналитическим решением.

Задача 1. Приток жидкости к совершенной скважине в неоднородной пористой среде.

Полная постановка задачи приведена в [8]. Область в виде квадратного параллелепипеда $\{0 \leq x \leq 200; -100 \leq y \leq 100; 0 \leq z \leq 10\}$ заполнена пористой средой (коэффициент пористости $m = 0,3$);

тензор абсолютной проницаемости $K(y) = \begin{cases} 5I, & y > 0; \\ I, & y < 0. \end{cases}$ Прямая ($x = 100, y = 50$) определяет

положение вертикальной скважины (диаметром 1 м) с заданным дебетом $Q = -1\,000 \text{ м}^3/\text{сут}$.

На боковой границе области задано условие для напора

$$H(x, y) = \begin{cases} \frac{10}{\pi} \left[\ln \left((x - 100)^2 + (y - 50)^2 \right) + \frac{2}{3} \ln \left((x - 100)^2 + (y + 50)^2 \right) \right], & y > 0; \\ \frac{50}{3\pi} \ln \left((x - 100)^2 + (y - 50)^2 \right), & y \leq 0. \end{cases} \quad (6)$$

На кровле и подошве задано условие непротекания $\frac{\partial H}{\partial n} = 0$.

Рассчитывается стресс-период, равный 1 суткам. Формула аналитического решения во всей области совпадает с формулой (5).

Задача описывается уравнением

$$\text{div}(K \text{ grad } H) = Q\delta(x - 100)\delta(y - 50).$$

Для решения задачи была использована неструктурированная треугольная сетка. Средняя длина ребра сетки составила 1,5 м. Количество ячеек в расчете — примерно 71 000.

На рис. 2 (см. также цветную вкладку) показано численное решение (в виде поля напоров) с наложенным на него аналитическим решением (черные линии) на момент времени $t = 1$ сут. Фиолетовыми линиями показаны изолинии численного решения (напор 47,5 м, 42,5 м, 37,5 м).

Сравнение численного и аналитического решений показывает их хорошее согласие. Относительное отклонение в тесте составляет 3%.

В расчетах тестов, не имеющих аналитического решения, результаты сравнивались с решениями, получаемыми по стандартным программным комплексам [1–3]. Приведем результаты расчетов некоторых тестов, не имеющих аналитического решения.

Задача 2. Тепловая конвекция с изменением плотности в фильтрационном потоке (задача Элдера).

Постановка задачи приведена в [2]. Прямоугольная область 600×150 м, ограниченная жесткими стенками, заполнена пористой средой (коэффициент пористости $m = 0,1$). Верхняя граница области поддерживается холодной ($T = 0$), а посередине нижней границы ($150 < x < 450$) задана температура $T = 100$. В нижних углах области задан постоянный напор $H = 0$. Учитывается сила тяжести. Со временем развивается неоднородное течение среды.

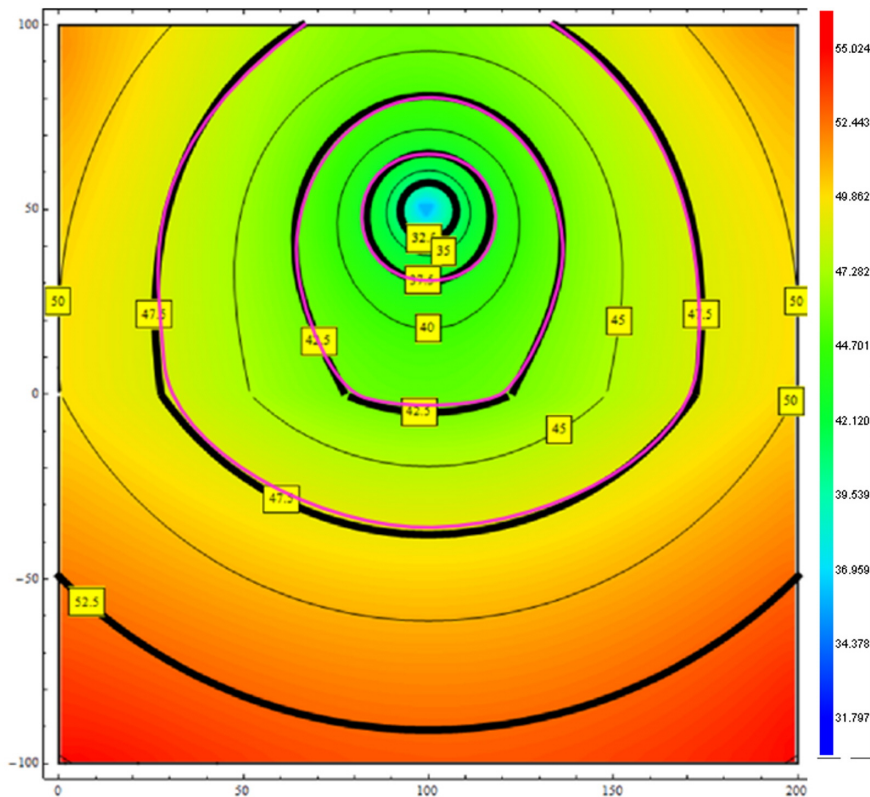


Рис. 2. Задача 1. Поле напора на момент времени $t = 1$ сут

Для решения задачи была использована регулярная четырехугольная сетка. Средняя длина ребра сетки составила 5 м. Количество ячеек в расчете — 3600.

На рис. 3 приведены изолинии температуры на момент времени $t = 20$ лет, полученные по комплексу НИМФА и по SEAWAT 2000 V.4, откуда видно качественное согласие результатов.

Различия в изолиниях могут быть обусловлены отличающимся выбором расчетного шага или разными схемами расчета одного счетного шага.

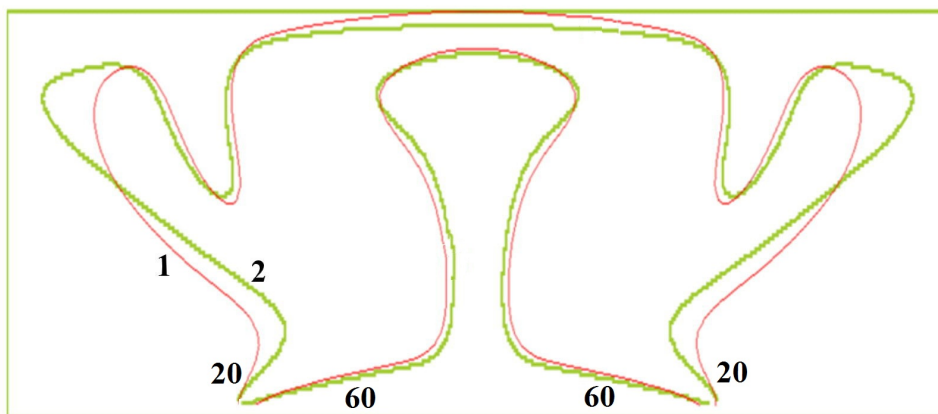


Рис. 3. Задача 2. Изолинии температуры, $t = 20$ лет: 1 — НИМФА; 2 — SEAWAT

Задача 3. Перенос нейтрального трассера на территориях площадок г. Сарова. Расчет данной задачи был выполнен по заказу Росатома в сотрудничестве с ФГБУ "Гидроспецгеология".

Средствами программного комплекса НИМФА созданы геофильтрационная и геомиграционная модели территории площадок. В результате расчетов этих моделей получено хорошее качественное и количественное согласие по распределению концентраций с пакетом MODFLOW. Относительная погрешность составила менее 4%. Вычисления по комплексу НИМФА (на 240 процессорах, время счета 5 минут) по сравнению с расчетом по MODFLOW в однопроцессорном режиме (11 часов счета) выполнены более чем в 130 раз быстрее (модель 2,3 млн ячеек, прогноз на 160 лет).

Задача 4. Перенос нейтрального трассера и двух радионуклидов на территории бывшего Кирово-Чепецкого химического комбината. Расчет данной задачи был выполнен по заказу Росатома в сотрудничестве с ФГБУ "Гидроспецгеология". Средствами программного комплекса НИМФА созданы геофильтрационная и геомиграционная модели территории комбината. В результате расчетов этих моделей получено хорошее качественное и количественное согласие по распределению концентраций с пакетом MODFLOW. Относительная погрешность составила менее 1,5%. Вычисления по комплексу НИМФА (на 600 процессорах, время счета 3,5 минуты) по сравнению с расчетом по MODFLOW в однопроцессорном режиме (7 часов счета) выполнены быстрее более чем в 110 раз (модель 2,9 млн ячеек, прогноз на 44 года).

Заключение

Разработан комплекс программ НИМФА, предназначенный для численного моделирования нестационарных трехмерных неизотермических геофильтрационных и геомиграционных задач фильтрации. В комплексе реализована методика решения нелинейной однофазной фильтрации жидкости и тепломассопереноса в пористых средах, разработана матрица верификации. На тестах с аналитическим решением показано, что погрешность результатов не превышает 5,6%. На тестах, не имеющих аналитического решения, показано качественное и количественное согласие с результатами, полученными по используемым в мире стандартным программным комплексам.

Отличительной особенностью комплекса НИМФА является применение суперкомпьютерных технологий, позволяющих проводить расчеты литологически сложных моделей на современных вычислительных системах в параллельном режиме. Это сокращает сроки проведения расчетов на порядки и повышает точность результатов за счет использования более подробной сеточной дискретизации моделей.

Список литературы

1. MODFLOW-USG. <http://www.swstecchnology.com/blog/modflow-usg-unstructured-grids-a-game-changer-for-groundwater-modeling>.
2. Dausman A. M., Langevin C. D., Thorne D. T. (Jr.), Sukop M. C. Scientific Application of SEAWAT to Select Variable-Density and Viscosity Problems. Investigations Report 2009-5028. U. S. Department of the Interior U. S. Geological Survey, 2009.
3. Официальный сайт компании Lawrence Berkeley National Lab. Earth Sciences Division. <http://esd.lbl.gov/research/projects/tough/software>.
4. Бутнев О. И., Горев И. В., Колесников С. С., Кузнецов В. Ю., Пронин В. А., Сидоров М. Л., Яруллин А. Д. Полностью неявная схема решения задач трехфазной фильтрации на неструктурированных сетках в пакете программ НИМФА // Вестник кибернетики. 2015. № 3 (19). С. 53–69.
5. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Карпов А. П., Кузнецов В. Ю., Петров Д. А., Резчиков В. Ю., Стаканов А. Н., Щаникова Е. Б. Параллельные решатели СЛАУ в пакетах программ Российского федерального ядерного центра — Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики // Вестник ПНИПУ. Аэрокосмическая техника. 2016. Вып. 47. С. 73–92.

6. Патент на изобретение № 2611892. Способ трехмерного моделирования заданного гидрогеологического объекта, реализуемый в вычислительной системе / Сидоров М. Л., Пронин В. А. 01.03.2017. <http://www.findpatent.ru/patent/261/2611892.html>
7. Сидоров М. Л., Пронин В. А. Неструктурированная призматическая дискретизация сложных геологических структур в параллельном режиме // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 1. С. 47–55.
8. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. М.: Наука, 1977.

Статья поступила в редакцию 28.09.17.

"NIMFA" SOFTWARE COMPLEX FOR SOLVING PROBLEMS OF NONLINEAR SINGLE-PHASE FLUID FLOWS AND HEAT-AND-MASS TRANSPORT IN POROUS MEDIA / O. I. Butnev, M. L. Glinskii, I. V. Gorev, A. A. Kuvayev, P. A. Mashen'kin, V. A. Pronin, M. E. Semenov, M. L. Sidorov (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region; FSBI "Hydrospetsgeologiya", Moscow).

The paper describes NIMFA software complex and techniques used to solve the single-phase fluid flow and heat-and-mass transport problems in porous media. The principal equations of the simulated processes and grids in use are presented. The qualitative and quantitative agreement between the results obtained for the problems having exact solutions and those solved using other program complexes is demonstrated.

Keywords: NIMFA software complex, single-phase flow model, heat-and-mass transport.
